

## CONTENTS

## ORIGINAL SCIENTIFIC PAPERS

## GENERAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Janežević, A., Popović, S., Partch, R., and Matijević, E.: Structure, Chemical Properties and Thermal Decomposition of Cadmium Methoxide and Cadmium Ethoxide . . . . .	1
Bedrica, A., Biruš, M., Kujundžić, N., and Pribanić, M.: Iron(III) Complexation by Hydroxyurea in Acidic Aqueous Perchlorate Solution . . . . .	21
Biruš, M., Krznarić, G., Kujundžić, N., and Pribanić, M.: Kinetic and Equilibrium Thermodynamic Description of the Interaction of Desferrioxamine B and Acetylhydroxamic Acid with Iron(III) in Acid Aqueous Perchlorate . . . . .	33
Alajbeg, A.: Thermal Decomposition of Tetrabromoethylcyclohexane . . . . .	41
Jańczuk, B., Wójcik, W., and Białopiotrowicz, T.: Wettability of Coal Surface and its Surface Free Energy Components . . . . .	51
Maksić, Z. B., Primorac, M., and Supek S.: Semiempirical vs. <i>Ab Initio</i> Calculations of Molecular Properties. Part 3. Electric Field Gradients at $^{14}\text{N}$ Nuclei in some Small Molecules . . . . .	65
Semenov, S. G., Sigolaev, Y. F., and Shevchenko, S. M.: Electron Transfer in Pre-reaction <i>p</i> -Quinonemethide-9,10-Dihydroxyanthracene Dianion System . . . . .	73
Mirnik, M.: Interpretation of Coagulation Kinetics Observed by Light Scattering . . . . .	81
Biczó, G.: Matrix Defectivity and Strange Electronic States of Polymers . . . . .	103
Edwards, H. G. M., Long, D. A., and Thomsen, M. A.: The Determination of Temperature in Methane-Air, Propane-Air and Butane-Air Flames Using the Raman Q-Branch Spectra of Nitrogen . . . . .	189
Houng, Ph. V., Grenier, J. C., and Bezdzicka, P.: Micro-Raman Spectra of YBaCuO Superconductors . . . . .	201
Brandmüller, J. and Claus, R.: Irreducible Tensors of the point Groups with Fivefold Rotational Axes . . . . .	267
Colombo, L., Kirin, D., Furić, K., Sullivan, J. F., and Durig, J. R.: Far Infrared and Raman Spectroscopic Investigations of the Lattice Modes of Crystalline Thiophene . . . . .	301
Clark, R. J. H. and Hempleman, A. J.: Infrared and Raman Spectroscopy of the Rhodium Tetraacetate Complexes $\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4$ , $\text{Rh}_2(^{18}\text{O}_2\text{CCH}_3)_4$ , $\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCD}_3)_4$ , and $\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CH}_3)_4(\text{H}_2\text{O})_2$ . . . . .	313
Dellepiane, G., Tubino, R., and Cuniberti, C.: On the Electron Phonon Interaction in <i>trans</i> Polyacetylene . . . . .	347
Virdee, H. R. and Hester, R. E.: <i>In Situ</i> Resonance Raman Spectroscopic Investigation of Polypyrrole Modified Gold Electrode . . . . .	357
Gatjal, A., Klæboe, P., Nielsen, C. J., and Powell, D. L.: The Conformations and Vibrational Spectra Including Matrix Isolation of 1,3-Dibromo-2,2-dimethylpropane . . . . .	375

Bertie, J. E., Harke, H., Khalique Ahmed, M., and Eysel, H. H.: Infrared Intensities of Liquids IV: Recent Measurements of Infrared Optical Constants and Absolute Infrared Absorption Intensities of Liquids by Multiple Attenuated Total Reflectance . . . . .	391
Dinović, K., Golić, L., Hadži, D., and Orel, B.: Intramolecular Hydrogen Bonding in Guanidinium and Potassium Hydrogen Malonates — an Infrared and X-Ray Diffraction Study . . . . .	405
Fujiwara, M., Hayashi, H., and Tasumi, M.: Low-Frequency Vibrational Spectra of Chlorophylls <i>a</i> and <i>b</i> in Solution: Effects of Axial Coordination . . . . .	435
Duncan, J. L.: The Use of Centrifugal Distortion Constants in Force Constant Calculations . . . . .	463
Schneider, S., Baumann, F., Klüter, U., and Gege, P.: Resonance Enhanced CARS Spectroscopy of Biliproteins . . . . .	505
Durig, J. R. and Little, T. S.: Vibrational and Conformational Studies of Cyclopropane-carboxaldehyde . . . . .	529
Steele, D., Hamilton, K., and Stevens, J.: The Use of Absolute Vibrational Band Intensities in Structural Analysis. I. <i>n</i> -Alkanes and Derived Ketones . . . . .	551
Righini, R., Angeloni, L., Castellucci, E., Foggi, P., Califano, S., and Dows, D. A.: Relaxation of Vibrational Excitons in Molecular-Ionic Crystals Measured by Picosecond Time-Resolved CARS . . . . .	621
Szostak, M.: Vibronic Couplings in Vibrational Spectra of Crystalline <i>p</i> -Chloroaniline . . . . .	633
Couzi, M., Negrier, Ph., Poulet, H., and Pick, R. M.: The Multidimensional Pseudo Spin Model and its Application to Phase Transitions in Layered Perovskites . . . . .	649
Hadni, A. and Gerbaux, X.: Far Infrared Phase Transitions, and Surface Layers . . . . .	679
Mink, J. and Szilagyi, T.: FT-IR Spectroscopic Studies of Catalysts . . . . .	719
Mink, J. and Keresztury, G.: FT-IR Emission Spectra of Chemisorbed Species, with Application to Species Adsorbed on Alumina . . . . .	731
Grasselli, J.: A New Era for Application of Vibrational Spectroscopy in Industry . . . . .	745
Shevchenko, S. M., Zubarev, E., and Rudenko, A. P.: On Formation of Anthra-semiquinone in the Conditions of Wood Alkaline Pulping . . . . .	763
El-Roudi, A. M., Aly, A. A. M., El-Gaber Abdel, A. A., and El-Shabasy, M.: Reactivity of Some Transition Metal Complexes of Anthranilic Acid with Leucine and Monochloroacetic Acid . . . . .	775
Janić, I., Kakaš, M., Baluk, P., Kubicki, A., and Kawski, A.: Electronic Spectra of Cyano-5-phenyltetrazoles . . . . .	783
Srzić, D., Shevchenko, S. M., and Klasinc, L.: Mass Spectral Study of Anthrone . . . . .	791
Graovac, A. and Cioslowski, J.: An Approximate Spectral Density for the Estimation of some Topological Indices of Alternant Systems . . . . .	797
Grabowski, S. J.: The Hydrogen Bonding in Solids. Part I. The Hydrogen Bonding Model for the O—H...O Systems in Crystals of Carboxylic Acids . . . . .	805
Grabowski, S. J.: The Bond Number Relationship for the O—H...O Systems . . . . .	815
Randić, M., Nikolić, S., and Trinajstić, N.: Enumeration of Kekulé Structures for Helicene Systems . . . . .	821
Wai-Kee Li: Structures and Stabilities of $C_3H_3^-$ Anions: an <i>ab initio</i> Molecular Orbital Study . . . . .	833
Filipek, S., Wagner, E., and Kalinowski, M. K.: Electroreduction of Benzalacetone in <i>N,N</i> -dimethylformamide . . . . .	843

## CHEMICAL SYNTHESIS

Kujundžić, N., Kovačević, K., Jakovina, M., and Glunčić, B.: Synthesis and Antibacterial Effect of Derivatives of 5-(3,4,5-Trimethoxybenzyl)-pyrimidine, -tetrahydropyrimidine, -Hexahydropyrimidine and -Hydantoin	121
Klisarova, Lj. and Lazarević, M.: Synthesis and Properties of Coordination Compounds of Co(II) and Ni(II) with Some Hydrazone Derivatives	137
Sharma, R. C. and Nagar, R.: Synthesis and Antifungal Properties of Some Transition Metal Complexes Involving Potentially Active Heterocyclic Ligands	849
Habuš, I., Raza, Z., and Šunjić, V.: Preparation of Chiral Diphenylphosphines from D-Glucose and Enantioselective Hydrogenation with Their Rh(I) Complexes	857

## NOTES

## GENERAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Semenov, S. G. and Shevchenko, S. M.: A CNDO/S3 Study of the <i>p</i> -Quinone-methide-Phenol Interaction	113
---	-----

## CHEMICAL SYNTHESIS

Klisarova, Lj. and Lazarević, M.: Synthesis and Properties of Coordination Compounds of Co(II) and Ni(II) with 3,4,5-Trimethoxybenzoylhydrazine	147
Aly, A. A. M., Kamal, M. M., El-Meligy, M. S., and El-Said, A. I.: New Mixed Ligand Complexes of Ditertiary Phosphanes with Ni(II) Alkylsanthates	155

## AUTHORS REVIEW

## GENERAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Novak, A.: Vibrational Spectroscopy and Structural Phase Transitions in Molecular Crystals	213
Bougeard, D.: Lattice Dynamics and Intermolecular Forces in Organic Molecular Crystals	243
Nakashima, S. and Hangyo, M.: Characterization of Low Dimensional Materials by Raman Spectroscopy	331
Bertoluzza, A. Fagnano, C., Fini, G., and Morelli, M. A.: Molecular Interactions and Properties of Biologically Active Compounds.: Infrared and Raman Spectroscopic Studies	413
McKean, D. C.: Interpreting the CH Stretching Region, Through Infrared Partial Deuteration Studies	447
Kiefer, W.: Micro-Raman Spectroscopy of Particles in the Mie-size Range: A Short Review	473
Schrötter, H. W., Berger, H., Boquillon, J. P., Lavorel, B., and Millot, G.: High-Resolution Nonlinear Raman Spectroscopy in Gases	487
Galabov, B., Dudev, T., and Durig, J. R.: Bond Properties and Molecular Conformation from Vibrational Intensity Analysis	569
Schrader, B.: Coupled Calculations of Vibrational Frequencies and Intensities. X. Calculation of Frequencies and Infrared and Raman Activities of large Molecules	589
Palmö, K., Pietilä, L. O., and Mannfors, B.: Valence Force Fields as a Tool in Vibrational Spectroscopy and Molecular Mechanics	605
Zhizhin, G. N., Krasjukov, Yu. N., Mukhtarov, E. I., Rogovoi, V. N., and Sidorov, N. V.: Orientational Order-Disorder Effects in Molecular Crystals as Evidenced by Low-Frequency Raman Spectra	685

## CHEMICAL SYNTHESIS

<b>Žemva, B.:</b> Binary Fluorides of Noble-Gases and Their Compounds . . . . .	163
---	-----

## APPENDIX

Book Reviews . . . . .	A1, A7
Linus Pauling — Honorary Member of the Croatian Chemical Society . . . . .	C1
Announcements . . . . .	C35
Meeting of the Croatian Chemical Society . . . . .	A15
Acknowledgement to Referees . . . . .	C43
Index and Contents of <i>Croatica Chemica Acta</i> Vol. 61 . . . . .	I
Errata . . . . .	C36

## SADRŽAJ

## ORIGINALNI ZNANSTVENI RADOVI

## OPĆA I TEORIJSKA KEMIJA

Janeković, A., Popović, S., Partch, R. i Matijević, E.: Struktura, kemijska svojstva i termički raspad kadmij metoksida i kadmij etoksida . . . . .	1
Bedrica, A., Biruš, M., Kujundžić, N., i Pribanić, M.: Kompleksacija željeza(III) sa hidroksiureom u vodenoj otopini perklorne kiseline . . . . .	21
Biruš, M., Krznarić, G., Kujundžić, N. i Pribanić, M.: Kinetičko i termodinamičko istraživanje djelovanja desferioksamina B i acetihidroksamne kiseline na željezo(III) u kiseloj vodenoj otopini perklorata . . . . .	33
Alajbeg, A.: Termička dekompozicija tetrabrometilcikloheksana . . . . .	41
Jańczuk, B., Wójcik, W. i Białopiotrowicz, T.: Kvasivost površine ugljena i pripadne komponente površinske slobodne energije . . . . .	51
Maksić, Z. B., Primorac, M. i Supek, S.: Semiempirijska vs. <i>ab initio</i> računanja molekulskih svojstava. Dio 3. Gradijenti električnog polja kod jezgri $^{14}\text{N}$ u nekim malim i srednje velikim molekulama . . . . .	65
Semenov, S. G., Sigolaev, Y. F. i Shevchenko, S. M.: Prijenos elektrona u predreakciji sustava <i>p</i> -kinonmetid-9,10-dihidroksiantracen . . . . .	73
Mirnik, M.: Tumačenje procesa koagulacije . . . . .	81
Biczó, G.: Defektnost matrica i neobična elektronska stanja polimera . . . . .	103
Edwards, H. G. M., Long, D. A. i Thosen, M. A.: Određivanje temperature plamenova metan-zrak, propan-zrak i butan-zrak primjenom Ramanovih spektara Q-grane dušika . . . . .	189
Huong, Ph. V., Grenier, J. C. i Bezdieka, P.: Mikro-Ramanovi spektri supervođiča YBaCuO . . . . .	201
Brandmüller, J. i Claus, R.: Ireducibilni tenzori točkinih grupa s peterokratnim rotacijskim osima . . . . .	267
Colombo, L., Kirin, D., Furić, K., Sullivan, J. F. i Durig, J. R.: Daleka infracrvena i ramanska istraživanja vibracija rešetke kristala tiofena . . . . .	301
Clark, R. J. H. i Hempleman, A. J.: Infracrvena i Ramanova spektroskopija	
Clark, R. J. H. i Hempleman, A. J.: Infracrvena i Ramanova spektroskopija dirodij-tetraacetatnih kompleksa $\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4$ , $\text{Rh}_2(^{18}\text{O}_2\text{CCH}_3)_4$ , $\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCD}_3)_4$ i $\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4(\text{H}_2\text{O})_2$ . . . . .	313
Dellepiane, G., Tubino, R. i Cuniberti, C.: O interakciji elektron-fonon u <i>trans</i> -poliacetilenu . . . . .	347
Virdee, H. R. i Hester, R. E.: Istraživanje <i>in situ</i> rezonantnih Ramanovih spektara zlatne elektrode modificirane polipirrolom . . . . .	357
Gatjal, A., Klaeboe, P., Nielsen, C. J. i Powel, D. L.: Konformacije i vibracijski spektri, uključujući matičnu izolaciju 1,3-dibromo-2,2-dimetilpropana . . . . .	375
Bertie, J. E.: Harke, H., Khalique Ahmed, M. i Eysel H. H.: Infracrveni intenziteti u tekućinama IV: Novija mjerenja infracrvenih optičkih konstanti i apsolutni infracrveni intenziteti u tekućinama s višekratnom prigušenom totalnom refleksijom . . . . .	391

Dinović, K., Golić, L., Hadži, D. i Orel, B.: Intramolekulska vodikova veza u gvanidini- i kalij-hidrogenmalonatum — studij infracrvenih spektara i rendgenske difrakcije . . . . .	405
Fujiwara, M., Hayashi, H. i Tasumi, M.: Niskofrekvencijski vibracijski spektri klorofila a i b u otopini: Efekti aksijalne koordinacije . . . . .	435
Duncan, J. L.: Upotreba centrifugalnih distorzijskih konstanti u proračunu konstanti sila . . . . .	463
Schneider, S., Baumann, F., Klüter, U. i Gege, P.: Rezonantno pojačana CARS spektroskopija biliproteina . . . . .	505
Durig, J. R. i Little, T. S.: Vibracijski i konformacijski studij ciklopropankarboksaldehida . . . . .	529
Steele, D., Hamilton, K. i Stevens, J.: Uporaba apsolutnih intenziteta vibracijskih vrpca u strukturnoj analizi. I. <i>n</i> -Alkani i derivirani ketoni . . . . .	551
Righini, R., Angeloni, L., Castellucci, E., Foggi, P., Califano, S. i Dows, D. A.: Relaksacija vibracijskih ekscitona u molekulsko-ionskim kristalima mjerena pikosekundnom vremenski razlučenom CARS . . . . .	621
Szostak, M.: Vibronske sprege u vibracijskim spektrima kristaliničnog <i>p</i> -kloranilina . . . . .	633
Couzi, M., Negrier, Ph., Poulet, H. i Pick, R. M.: Multimedijski pseudospinski model i njegove primjene na fazne prijelaze u slojevitim perovskitima . . . . .	649
Hadni, A. i Gerbaux, X.: Daleki infracrveni spektri, fazni prijelazi i površinski slojevi . . . . .	671
Mink, J. i Szilagyi, T.: FT-IR spektroskopski studij katalizatora . . . . .	719
Mink, J. i Kereztesy, G.: FT-IR emisijski spektri kemisorbiranih vrsta, s primjenom na vrste adsorbirane na aluminij oksidu . . . . .	731
Grasselli, G.: Nova era za primjene vibracijske spektroskopije u industriji . . . . .	745
Shevchenko, S. M., Zubarev, E. i Rudenko, A. P.: O nastajanju antrasemikiona u alkalnoj drvenoj pulpi . . . . .	763
El-Roudi, A. M., Aly, A. A. M., El-Gaber Abdel A. A. i El-Shabasy, M.: Reaktivnost kompleksa prijelaznih metala i antranilne kiseline s leucinom i monoklorooctenom kiselinom . . . . .	775
Janić, I., Kakaš, M., Baluk, P., Kubicki, A. i Kawski, A.: Elektronski spektri cijano-5-feniltetrazola . . . . .	783
Srzić, D., Shevchenko, S. M. i Klasine, L.: Studij spektra masa antrona . . . . .	791
Graovac, A. i Cioslowski, J.: Procjena nekih topoloških indeksa u alternantnim sustavima pomoću jedne približne spektralne gustoće . . . . .	797
Grabowski, S. J.: Vodikova veza u krutinama. Dio I. Model vodikove veze za O—H...O u kristalima karbonskih kiselina . . . . .	805
Grabowski, S. J.: Relacija za težinu veze sustava O—H...O . . . . .	815
Randić, M., Nikolić, S. i Trinajstić, N.: Prebrojavanje Kekuléovih struktura helicinskih sustava . . . . .	821
Wai-Kee Li: Strukture i stabilnosti C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> <sup>-</sup> . . . . .	833
Filipek, S., Wagner, E. i Kalinowski, M. K.: Elektrodna redukcija benzalacetona u <i>N,N</i> -dimetilformamidu . . . . .	843

## KEMIJSKA SINTEZA

Kujundžić, N., Kovačević, K., Jakovina, M. i Glunčić, B.: Sintaza i antibakterijsko djelovanje nekih derivata pirimidina i hidantoina . . . . .	121
Kilsarova, Lj. i Lazarević, M.: Sintaza i svojstva koordinacionih spojeva Co(II) i Ni(II) s nekim hidrazinskim derivatima . . . . .	137

Sharma, R. S. i Nagar, R.: Sinteza i antigljivično djelovanje nekih kompleksa prijelaznih elemenata . . . . .	349
Habuš, I., Raza, Z. i Sunjić, V.: Priprava kiralnih difenilfosfina iz D-glukoze i enantioselektivna hidrogenacija s njihovim Rh(I) kompleksima . . . . .	857

## BILJEŠKE

## OPCA I TEORIJSKA KEMIJA

Semenov, S. G. i Shevchenko, S. M.: CNDO/S3 studija interakcije <i>p</i> -kinonmetida s fenolom . . . . .	113
---	-----

## KEMIJSKA SINTEZA

Klisarova, Lj. i Lazarević, M.: Sinteza i svojstva koordinacionih spojeva 3,4,5-trimetoksibenzoilhidrazina . . . . .	147
Aly, A. A. M., Kamal, M. M., El-Meligy, M. S. i El-Said, A. I.: Novi mješoviti kompleksi ditercijarnih fosfana s nikal(II)-alkilksantatima . . . . .	155

## AUTORSKI PREGLED

## OPCA I TEORIJSKA KEMIJA

Novak, A.: Vibracijska spektroskopija in strukturni fazni prehodi molekulskih kristalov . . . . .	213
Bougeard, D.: Dinamika rešetke i intermolekulske sile u organskim molekulskim kristalima . . . . .	243
Nakashima, S. i Hangyo, M.: Karakterizacija niskodimenzijskih materijala Ramanovom spektroskopijom . . . . .	331
Bertoluzza, A., Fagnano, C., Fini, G. i Morelli, M. A.: Molekulske interakcije i svojstva biološki aktivnih spojeva: studij infracrvenom i Ramanovom spektroskopijom . . . . .	413
McKean, D. C.: Interpretacija područja CH rastezanja s pomoću infracrvenih spektara djelomično deuteriranih spojeva . . . . .	447
Kiefer, W.: Mikro-Ramanova spektroskopija čestica u području Mieove veličine: kratki pregled . . . . .	473
Schrötter, H. W., Berger, H., Boquillon, I. P., Lavorel, B. i Millot, G.: Nelinearna Ramanova spektroskopija visokog razlučivanja u plinovima . . . . .	487
Galabov, B., Dudev, T. i Durig, J. R.: Svojstva veza i molekulska konformacija iz analize vibracijskih intenziteta . . . . .	569
Schrader, B.: Spregnuti proračuni vibracijskih frekvencija i intenziteta. X. Proračun frekvencija i infracrvenih i Ramanovih intenziteta za velike molekule . . . . .	589
Palmö, K., Pietilä, L. O. i Mannfors, B.: Valentna polja sila kao sredstvo vibracijske spektroskopije i molekulske mehanike . . . . .	605
Zhizhin, G. N., Krasjukov, Yu. N., Mukhtarov, E. I., Rogovoi, V. N. i Sidorov, N. V.: Proučavanje reorijentacijskih kretanja molekula u kristalima pomoću Ramanove spektroskopije niskih frekvencija . . . . .	685

## KEMIJSKA SINTEZA

Zemva, B.: Pregled dela na sintezi binarnih fluoridov žlahthnih plinov . . . . .	163
--	-----

## PRILOZI

Prikazi knjiga . . . . .	A1, A7
Obavijesti . . . . .	C1
Linus Pauling — Počasni član Hrvatskoga kemijskog društva . . . .	C35
Godišnja skupština Hrvatskoga kemijskog društva . . . . .	A15
Zahvala recenzentima . . . . .	C43
Indeks i sadržaj <i>Croat. Chem. Acta</i> , Vol. 61 . . . . .	I
Errata . . . . .	C36



